

ビス(ベンゾイミダゾール)配位亜鉛ジクロリド錯体の結晶内に包摂された *N,N*-ジメチルホルムアミドの他の有機分子への交換反応

(弘前大理工¹・弘前大院理工²) ○石井 萌々¹・岡崎 雅明²・太田 俊²

Replacement Reactions of *N,N*-Dimethylformamide by Other Organic Molecules within the Crystal of a Bis(benzimidazole)-coordinated Zinc Dichlorido Complex (¹*Faculty of Science and Technology, Hirosaki University*, ²*Graduate School of Science and Technology, Hirosaki University*) ○Momo Ishii,¹ Masaaki Okazaki,² Shun Ohta²

This study examined the guest exchange reactions of the *N,N*-dimethylformamide (DMF)-solvated crystals of bis(benzimidazole)-coordinated zinc dichlorido complex **1** (**1**·(DMF)₃). When **1**·(DMF)₃ was exposed to ethanol (EtOH) or acetone vapor, the exchange of DMF with EtOH or acetone proceeded via single-crystal-to-single-crystal transformation processes. The results of guest exchange experiments with other organic vapors will also be reported.

Keywords : Zinc Complex, Guest Exchange, Single-crystal-to-single-crystal Transformation, Hydrogen Bond, Single Crystal X-ray Structure Analysis

蒸気への曝露や液体への浸漬により、多孔性分子結晶中のゲストを別の分子へ置き換える手法をゲスト交換と呼ぶ¹⁾。例えば、高沸点のゲストから低沸点のものへの交換により、穏和な条件での多孔性結晶の活性化が可能となる。我々は最近、Fig. 1 に示す錯体 **1** が、多孔性結晶を与えることを明らかにした²⁾。しかし、錯体 **1** は高沸点の *N,N*-ジメチルホルムアミド (DMF) やジメチルスルホキシドにしか溶けないため、錯体 **1** を基盤とする多孔性結晶の活性化は達成できていなかった。本研究では、この解決に向けた第一歩として、DMF を含む錯体 **1** の結晶 **1**·(DMF)₃ (Fig. 2) のゲスト交換を検討した。

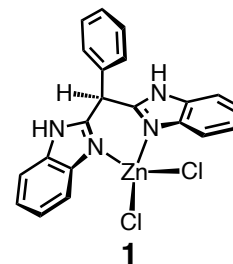


Fig. 1 Structure of complex **1**.

1·(DMF)₃ を作製し、単結晶 X 線結晶構造解析を行なった結果、錯体あたり 3 分子存在する DMF の内 2 つが、錯体 **1** のベンゾイミダゾール系二座配位子の NH 部位との間で N-H···O 水素結合を形成していることが分かった。**1**·(DMF)₃ をエタノール (EtOH) またはアセトンの蒸気にさらしたところ、単結晶性を維持したままゲスト交換が進行し、結晶 **1**·(EtOH)₂ または **1**·(acetone) がそれぞれ得られた (Fig. 2)。骨格に水素結合で保持されたゲストの交換が、蒸気にさらすだけで容易に進行したことは興味深い。他の有機分子とのゲスト交換の検討結果も報告する。

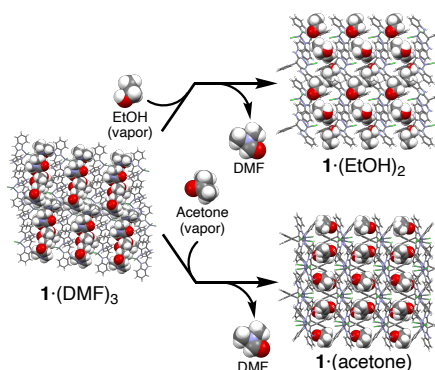


Fig. 2 Guest exchanges from **1**·(DMF)₃ to **1**·(EtOH)₂ or **1**·(acetone).

1) Raymond, K. N. *et al. Chem. Soc. Rev.* **2007**, 36, 161–171. 2) Ohta, S. *et al. Inorg. Chem.* **2022**, 61, 19890–19898.